

параметров для улучшенной сходимости самосогласованной процедуры и получения физических результатов. Для полученных оптимизированных моделей были рассчитаны ИК спектры колебаний молекул СО и произведено их сравнение с литературными данными.

В результате данной работы были получены энергии и расстояния между палладием и углеродом, углеродом и кислородом, что даёт нам возможность выбрать наиболее низкоэнергетические модели для дальнейшего изучения. Кроме того, были рассчитаны частоты ИК колебаний молекул СО на поверхности кластеров палладия. Было произведено их сравнение с литературными данными. Положения и интенсивности пиков сравнимы с литературой, что означает адекватность расчётов.

Помимо теоретического исследования была разработана схема для точного смешения и подачи газов для проведения in-situ измерения ИК спектров. Предложенная схема позволит провести экспериментальные измерения сухих образцов в потоке различных газов с контролируемым давлением.

Ячейка для исследования катодных материалов для современных литий-ионных батарей

Русалев Юрий Владимирович

Шаповалов Виктор Васильевич

МИЦ «Интеллектуальные материалы, Южного федерального университета

Гуда Александр Александрович, к.ф.-м.н.

yuri.rusalev@gmail.com

Литий-ионные аккумуляторы прочно вошли в повседневную жизнь человека. Несмотря на это, существует целый ряд проблем, связанный с их использованием. Например, старение материалов внутри батареи, необходимость специальных циклов зарядки и разрядки для продолжительной службы, небольшая ёмкость, высокая стоимость, а также маленький температурный диапазон эксплуатации. Что бы решить все эти проблемы, необходимо понимать, что происходит с материалами внутри аккумулятора во время его использования. Разрабатываемая нами, ячейка позволит проводить анализ веществ внутри батареи с помощью рентгеновского излучения и электрохимических методов, что позволит нам измерять характеристики батареи in-situ.

Наша установка состоит из двух частей. Первая часть — это электроника, которая позволяет измерять такие характеристики как ёмкость, и вольт-амперные характеристики во время разрядки и зарядки аккумулятора. Блок управления основан на базе микроконтроллера архитектуры AVR ATmega 2560 с 10-битным АЦП, что позволяет нам проводить до 120 измерений в минуту с точностью 2 мВ и 1мА. Контроль силовых цепей осуществлён с помощью внешнего 8-битного ЦАП. Вдобавок ко всему, на борту устройства имеется встроенный USB-COM мост для обмена данными с специальным программным обеспечением на ПК. Разработанное ПО осуществляет контроль основных режимов работы электроники. Основными функциями являются заряд и разряд батареи, измерение ёмкости и уровня заряда, а также заряд и разряд батареи определёнными токами в нужном диапазоне напряжений.

Вторая часть — это ячейка, в которую непосредственно загружаются исследуемые материалы. Она состоит из двух алюминиевых половинок. На каждую половинку вклеено токопроводящее окошко, прозрачное для рентгеновского пучка, толщиной 100 микрон. Для данной ячейки есть возможность установки специальных окон толщиной до 300 микрон, а также металлических фольг и других тонких материалов. Две половинки соединяются с помощью тефлоновой прокладки и шести болтов.

В результате была сконструирована и изготовлена ячейка, позволяющая проводить эксперименты по рентгеновскому поглощению и дифракции на различных источниках. Данную ячейку возможно использовать не только на синхротронах и лазерах на свободных электронах, но и на лабораторных установках, благодаря тонким окнам из специальных материалов. По мимо этого была создана простейшая электроника и программное обеспечение для измерений. Также ячейку возможно использовать и с коммерческими потенциостатами, что позволяет добиться высокой точности.